Index

Commentationes et Relationes

AHLRICHS, R., s. GÉLUS, M., et al. . . . 63
ANDRÉ, J. M., ANDRÉ, M. CL., LEROY, G.: Etude théorique de quelques cycles à quatre pièces . . . 28
ANDRÉ, M. CL., s. ANDRÉ, J. M., et al. . . . 28
ANNO, T., TERUYA, H.: Systematic Determination of the Slater-Condon Parameters of Atoms and Ions with $1s^2\ 2s^m\ 2p^n$ Configurations . . . 127

BARBIER, CL., FAUCHER, H., BERTHIER, G.: Calcul approché des contributions dipolaires et orbitales au couplage J_{CC} à l'aide de fonctions d'onde LCAO-SCF non empiriques 105
BARTLETT, R. J., ÖHRN, Y.: How Quantitative is the Concept of Maximum Overlap ? . . 215
BERTHIER, G., s. BARBIER, CL., et al. . . . 105
BILLINGSLEY, II, F. P., s. SHILLADY, D. D., et al. . . . 1
BISHOP, D. M., WU, AY-JU A.: An Investigation of the $^1B_1$ Excited States of Water . . 287
BLOOR, J. E., s. SHILLADY, D. D., et al. . . . 1
BONACCORSI, R., SCROCCO, E., TOMASI, J.: Molecular SCF Calculations for the Ground State of Some Three-Membered Ring Molecules: *Cis* and *Trans* Diaziridine, Oxaziridine and the Corresponding Imminium Ions . . . 17
BROCAS, J.: The Solution of the Rate Equations for Berry Processes . . . 79
BROWN, R. D., BURDEN, F. R., WILLIAMS, G. R., PHILLIPS, L. F.: Simplified *Ab-Initio* Calculations on Hydrogen-Containing Molecules . . . 205
BURDEN, F. R., s. BROWN, R. D., et al. . . . 205

DIERCKSEN, G. H. F.: SCF-MO-LCGO Studies on Hydrogen Bonding. The Water Dimer 335

FAUCHER, H., s. BARBIER, CL., et al. . . . 105
FRANCHINI, P. F., ZANDOMENEGHI, M.: GF Calculations for Some Tricyclic Molecules: C_3H_6, C_3H_4, C_2H_4NH, C_2H_4O and C_2H_4S . . . 90
FRICKE, B., GREINER, W., WABER, J. T.: The Continuation of the Periodic Table up to $Z = 172$. The Chemistry of Superheavy Elements . . . 235

GÉLUS, M., AHLRICHS, R., STAEMMLER, V., KUTZELNIGG, W.: *Ab Initio* Calculations of Small Hydrides Including Electron Correlation. VI. Study of the Correlation Energy of the BH Ground State and Its Dependence on the Internuclear Distance . . . 63
GREINER, W., s. FRICKE, B., et al. . . . 235

HARTMANN, H.: Eine klassische Störungstheorie . . . 185
— s. KEHL, S., et al. . . . 44
— PAPULA, L., STREHL, W.: OCE-Modellrechnungen mit minimalen STO-Basissätzen an einigen Zinnhydriden vom Typ SnH_n, SnH_n^+ und SnH_n^- ($n = 3, 4$ oder 5) . . . 69
— — — Quantenmechanische Behandlung der K_α-Satellitenstruktur des Phosphors 261
HAWORTH, D. T., s. SCHERR, V. M. . . . 143
HEGYI, M. G., MEZEI, M., SZONDY, T.: Determination of Molecular Properties by the Method of Moments. III . . . 168
HELFRICH, K.: Generalized Quantum Mechanical Two-Centre Problems. III. Calculation of Exact Expectation Values . . . 381
— s. KEHL, S., et al. . . . 44

JANSEN, H. B., ROS, P.: A Study of the Effect of Protonation on the Electronic Structure of the Diatomic Molecules BF, CO and N_2 . . . 199
JOHANSEN, H.: Small Gaussian Basis Sets in *Ab Initio* Calculations . . . 9
DE JONG, J., MACLEAN, C.: Semi-Empirical Calculations on the ZFS Parameters of Phosphorescent Charge-Transfer Complexes . . . 98

KEHL, S., HELFRICH, K., HARTMANN, H.: Generalized Quantum Mechanical Two-Centre Problems. II. The Case of Equal Centres . . . 44
KUTZELNIGG, W., s. GÉLUS, M., et al. . . . 63

LADÁNYI, K., LENGYEL, V., SZONDY, T.: Determination of Molecular Properties by the Method of Moments. IV. Scattering Problems . . . 176
LANGLET, J., MEER, H. VAN DER: Calculation of Molecular Geometry with the PCILO-Method . . . 410
LENGYEL, V., s. LADÁNYI, K., et al. . . . 176
LEROY, G., s. ANDRÉ, J. M., et al. . . . 28

MacLean, C., s. de Jong, J. 98
Magnasco, V.: A Simple Model of Short-Range Interactions. I. Theory 267
— Musso, G. F.: A Simple Model of Short-Range Interactions. II. The Orientation Dependence of the Interaction between Non-Bonded Hydrogen Atoms 280
McGlynn, S. P., s. Watson, F. H., jr. 309
Meer, H. van der, s. Langlet, J. 410
Meza, S., Wahlgren, U.: *Ab initio* Calculations on Ethylene and Fluoroethylene. A Comparative Study 323
Mezei, M., s. Hegyi, M. G., et al. 168
Müller, H.: Bindungsverhältnisse und Elektronenverteilung im Br_4^{2-}-Ion 110
Murrell, J. N., s. Živković, T. 301
Musso, G. F., s. Magnasco, V. 280

Öhrn, Y., s. Bartlett, R. J. 215

Papula, L., s. Hartmann, H., et al. 69
— s. Hartmann, H., et al. 261
Phillips, L. F., s. Brown, R. D., et al. 205
Pujol, L., s. Simon, J.-Cl. 191

Røeggen, I.: The Inversion Eigenvalues of Non-Σ States of Diatomic Molecules, Expressed in Terms of Quantum Numbers 398
Roos, B., Siegbahn, P.: MO-SCF-LCAO Studies of Sulphur Compounds. I. H_2S and SO_2 368
Ros, P., s. Jansen, H. B. 199

Sadlej, A. J.: Approximate Variation-Perturbation Calculations of the Second-Order Molecular Properties. II. Electric Polarizabilities 159
Schaad, L. J., Thomas, I. L.: Valence Bond Functions for the Hydrogen Molecule . . . 115
Scherr, V. M., Haworth, D. T.: A Semiempirical Molecular Orbital Calculation of Borazine and Some B-Trifluoroborazines 143
Scrocco, E., s. Bonaccorsi, R., et al. 17
Shanshal, M.: Inversion des aromatisch-substituierten Stickstoffs 149
Shillady, D. D., Billingsley, II, F. P., Bloor, J. E.: Valence Shell Calculations on Polyatomic Molecules. IV. The Effect of Deorthogonalization on CNDO/2 Dipole Moments and Charge Distributions 1
Siegbahn, P., s. Roos, B. 368
Simon, J.-Cl., Pujol, L.: Influence des charges nucléaires effectives σ et π sur les calculs LCAO-MO-SCF-π. Cas des polyènes linéaires complètement trans et du fulvène . . 191
Staemmler, V., s. Gélus, M., et al. 63
Strehl, W., s. Hartmann, H., et al. 69
— s. Hartmann, H., et al. 261
Szondy, T., s. Hegyi, M. G., et al. 168
— s. Ladányi, K., et al. 176

Teruya, H., s. Anno, T. 127
Thomas, I. L., s. Schaad, L. J. 115
Tomasi, J., s. Bonaccorsi, R., et al. 17

Varga, J. A., Zumdahl, S. S.: Nuclear Spin Coupling Constants from the Extended Hückel Method 211

Waber, J. T., s. Fricke, B., et al. 235
Wahlgren, U., s. Meza, S. 323
Watson, F. H., Jr., McGlynn, S. P.: Electronic Transitions in Mono-Olefinic Hydrocarbons. Part II. Experimental Results 309
Williams, G. R., s. Brown, R. D., et al. 205
Wu, Ay-ju A., s. Bishop, D. M. 287

Zandomeneghi, M., s. Franchini, P. F. 90
Živković, T., Murrell, J. N.: Finite Analytical Expressions for Two-Centre Exchange Integrals between Slater Orbitals Having the Same Exponents 301
Zumdahl, S. S., s. Varga, J. A. 211

Indexed in Current Contents

Theoretica Chimica Acta

For speedy publication, this journal is issued at frequent intervals, according to the amount of material received, 4 issues normally constituting one volume. Price per volume: DM 120.—.

It is a fundamental condition that manuscripts submitted should not have been published elsewhere, in this or any other country. The author must undertake not to publish elsewhere at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries, including all rights of photocopying or reproduction by any other method.

The use in this journal of registered or trade names, trademarks etc. without special acknowledgement does not imply that such names, as defined, by the relevant protection laws, may be regarded as unprotected and thus free for general use.

Die Zeitschrift erscheint, um eine rasche Publikation zu ermöglichen, in einzelnen Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Ein Band besteht im allgemeinen aus 4 Heften. Der Preis eines Bandes beträgt DM 120,—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît à de courts intervalles, suivant les articles reçus. En général un volume se compose de 4 fascicules. Le prix de chaque volume est de 120 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscript accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que des ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . . , des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis pas la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

THEORETICA CHIMICA ACTA

Vol. 21

Index

Fasc. 4

Commentationes

WATSON, F. H. JR., MCGLYNN, S. P.: Electronic Transitions in Mono-Olefinic Hydrocarbons. Part II. Experimental Results 309

MEZA, S., WAHLGREN, U.: *Ab initio* Calculations on Ethylene and Fluoroethylene. A Comparative Study 323

DIERCKSEN, G. H. F.: SCF-MO-LCGO Studies on Hydrogen Bonding. The Water Dimer 335

ROOS, B., SIEGBAHN, P.: MO-SCF-LCAO Studies of Sulphur Compounds. I. H_2S and SO_2 368

HELFRICH, K.: Generalized Quantum Mechanical Two-Centre Problems. III. Calculation of Exact Expectation Values. 381

RØEGGEN, I.: The Inversion Eigenvalues of Non-Σ States of Diatomic Molecules, Expressed in Terms of Quantum Numbers 398

Relatio

LANGLET, J., MEER, H. VAN DER: Calculation of Molecular Geometry with the PCILO-Method 410

Indexed in Current Contents

Responsible for advertisements: Edgar Seidler, D-1000 Berlin 15, Kurfürstendamm 237
Telephone (03 11) 8 83 37 55, Telex: 01-82 811
Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York
Printed in Germany by Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen
© by Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1971